

東京大学大学院工学系・総合研究機構の幾原雄一教授グループでは、電子線を0.1ナノメートル以下まで細く収束させることが可能な走査透過電子顕微鏡を用いて、代表的なセラミックスであるアルミナに微量成分として添加されているイットリウム原子を直接観察した。その観察結果を基に、量子力学の基本原則に従って物質の特性を導き出す理論計算から、イットリウム原子と周囲のアルミニウム原子との間に大きな共有結合が出現していることを明らかにし、この共有結合がイットリウム微量添加アルミナの高温強度を大幅に向上させているというメカニズムを解明した。

トピックス 4 セラミックス中の添加原子の強度向上メカニズムを解明

セラミックスに微量の添加材を加えると、その硬さや強度、電気特性などを大幅に向上できる。これまでのセラミックスの開発は、材料試作とマクロ挙動評価の繰返しによる経験の積み重ねに基づいて主に行われてきた。代表的セラミックスであるアルミナ (Al_2O_3) 中に添加された微量成分であるイットリウム (Y) によって強度が向上することが知られているが、そのメカニズムは不明であった。

東京大学大学院工学系・総合研究機構の幾原雄一教授グループは、これまで不明であった、Y 微量添加アルミナの高温高強度化のメカニズムを突き止めた。アルミナの結晶粒界に Y が存在することを局所領域の化学組成分析で特定したあと、電子線を0.1ナノメートル以下まで細く収束させた走査透過電子顕微鏡 (STEM^①) を用いて、Y 原子の一個一個を直接観察することに成功した。この観察結果を基に、さらに、原子構造観察と同時に得られた電子エネルギー・スペクトルデータなどを用いて理論計算をおこない、添加原子である Y とその周囲に存在するアルミニウム (Al) 原子との結合の状態を明らかにした。すなわち、Y 原子と

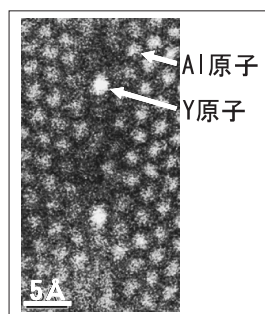
周囲の Al 原子との間に大きな共有結合が出現していることを明らかにし、この共有結合の存在が強度を向上させている要因であると結論づけた。ここで、理論計算とは、原子の配列やそれらの間の電子軌道などを、経験的なパラメーターを用いることなく、量子力学の基本原則にしたがって計算する第一原理計算のことである。

本研究の成果は、母材のどの位置に添加原子が入り込み、これらがどのような結合作用を周囲の原子に及ぼすかを解明することにつながる。目標とする材料の特性や機能に合わせて原子スケールにおいて添加材の種類や量を決定することができる新しい材料設計に結び付く可能性もあり、2006年1月13日付のサイエンス誌で発表された。

① STEM (Scanning Transmission Electron Microscope):

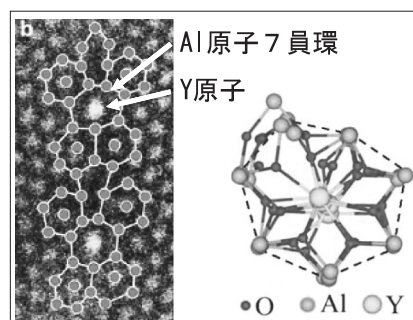
電子線を試料上で走査し、試料により透過散乱された電子線の強度で、試料中の局所構造を観察する装置である。0.1ナノメートル以下まで細く収束させた電子線を用いると、材料を構成する個々の原子やそれらから構成される原子の局所状態を直接観察可能となる。

アルミナ結晶粒界の STEM 像



Y 原子が周りの Al 原子より明るい点として観察される

粒界に形成された Al 原子 7 員環の中央に存在する Y 原子とその配列状態



写真および図提供：東京大学 幾原教授